

## Термоэлектрическая добротность монополярных полупроводников ограниченных размеров

© В.С. Закордонец, Г.Н. Логвинов

Тернопольский государственный педагогический институт,  
282009 Тернополь, Украина

(Получена 14 декабря 1995 г. Принята к печати 30 мая 1996 г.)

Теоретически исследована добротность монополярных полупроводниковых материалов с невырожденным газом носителей заряда с учетом рассогласования температур электронов и фононов, которое возникает вследствие действия на них разных поверхностных механизмов релаксации энергии на контактах образца с термостатом. Показано, что в случае изотермических граничных условий для электронной подсистемы и адиабатических условий для фононной подсистемы термоэлектрическая добротность образца будет возрастать при уменьшении его линейных размеров, достигая максимального значения в пленках субмикронной толщины.

Как известно, добротность термоэлектрических материалов определяется соотношением [1]

$$Z = \frac{\alpha^2 \sigma}{\kappa_e + \kappa_p}, \quad (1)$$

где  $\alpha$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa_e$ ,  $\kappa_p$  — коэффициенты термоэдс, электропроводности, электронной и фононной теплопроводностей соответственно. Известно также, что формула (1) была получена для материалов без учета их геометрических размеров. Между тем при изучении термоэлектрических свойств полупроводников наиболее общим и одним из важнейших факторов приближения к реальной ситуации является именно их учет [2]. Естественно, что в этом случае появляется необходимость формулировки токовых и тепловых граничных условий (ГУ). Обычно при постановке тепловых ГУ на стенках задается суммарный тепловой поток, связанный с переносом тепла в подсистемах носителей заряда и фононов. В то же время, как показывают эксперименты [3,4] и их теоретическое обобщение [2], имеется возможность управлять этими потоками на границах образца порознь. Это обстоятельство приводит к тому, что на расстояниях порядка длины остывания  $L$  (см. работу [5]) от поверхностей, контактирующих с внешними термостатами, температуры электронов  $T_e$  и фононов  $T_p$  различны [6]. Поскольку численные значения электрон-фононной длины остывания важны для оценок термоэлектрической добротности, в таблице приведены значения этой величины для ряда полупроводников и металлов при комнатной температуре [7]. В этом так называемом двухтемпературном приближении термоэлектрическая добротность была рассчитана только в субмикронных слоях при условии  $a/L \ll 1$ , где  $2a$  — толщина слоя [8]. Целью настоящей работы — получение обобщенного параметра термоэлектрической добротности, справедливого для полупроводниковых образцов произвольных размеров.

Пусть изотропный, монополярный полупроводниковый образец с невырожденным электронным газом

имеет форму прямоугольного параллелепипеда, торцевые поверхности которого  $x = \mp a$  контактируют с термостатами при температурах  $T_1$  и  $T_2$  ( $T_1 > T_2$ ), а боковые грани адиабатически изолированы для всех подсистем квазичастиц. Образец замкнут на внешнее металлическое сопротивление  $R_m$  длиной  $2b$  так, что в цепи протекает термоэлектрический ток  $j$ . В целях простоты ограничимся рассеянием носителей заряда на акустических фононах. Считаем, что граничные условия для электронной и фононной подсистем удовлетворяют наиболее общим ГУ теплопроводности [6].

В рамках выбранной модели в линейном по величине  $(T_1 - T_2)/T^*$  приближении ( $T^* = (T_1 + T_2)/2$ ) термоэлектрический ток и распределение электронной и фононной температур были подробно изучены в [9] и представляются выражениями, которые удобно представить в виде

$$T_{e,p} = T^* - \frac{\Delta T}{2} \left\{ \frac{x}{a} - \frac{[A_e + \delta A_p(1 + \lambda)] \frac{x}{a} - \gamma_{e,p} [B_e - B_p - \lambda B_p] \frac{\text{sh } kx}{ak \text{ch } ka}}{A_e B_p + \delta A_p B_e} \right\}, \quad (2)$$

где

$$A_{e,p} = 1 + \frac{\kappa_{es,ps}}{\kappa_{e,p}} \frac{\text{th } ak}{ak}, \quad B_{e,p} = 1 + \frac{\kappa_{es,ps}}{\kappa_{e,p}}, \quad \kappa_{es,ps} = a\eta_{e,p}.$$

Эти параметры имеют смысл поверхностных электронной и фононной теплопроводностей;  $\eta_{e,p}$  — коэффициенты, определяющие интенсивность теплообмена электронной и фононной подсистем с термостатами,

$$L = k^{-1} = (k_e^2 + k_p^2)^{-1/2}$$

— электрон-фононная длина остывания,

$$k_{e,p}^2 = P/\kappa_{e,p}, \quad \delta = k_p^2/k_e^2 = \kappa_e/\kappa_p,$$

Обратные длины остывания электронов и фононов некоторых материалов

Материал	$k, \text{см}^{-1}$	Материал	$k, \text{см}^{-1}$
Ge	$6.0 \cdot 10^3$	Si	$1.7 \cdot 10^4$
GaAs	$2.5 \cdot 10^3$	InSb	$1.0 \cdot 10^4$
Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	$1.8 \cdot 10^4$	CdS	$1.8 \cdot 10^5$
CdSe	$3.7 \cdot 10^4$	HgSe	$1.1 \cdot 10^3$
GaP	$1.4 \cdot 10^5$	InP	$4.3 \cdot 10^3$
PbTe	$1.3 \cdot 10^4$	HgTe	$1.0 \cdot 10^3$
Sn	$2.5 \cdot 10^5$	Pb	$3.9 \cdot 10^5$
InAs	$1.8 \cdot 10^5$	Cu	$4.9 \cdot 10^5$
Ag	$4.6 \cdot 10^4$	Au	$8.1 \cdot 10^4$

$\gamma_e = 1, \gamma_p = -\delta, P$  — параметр, определяющий интенсивность взаимодействия электронной и фононной подсистем [6],  $\Delta T = T_1 - T_2$ ;

$$j = \frac{(1 - \beta)\alpha_s + \beta\alpha}{R} \Delta T, \quad (3)$$

где  $R = R_0 + R_{\Pi} + R_m$  — полное сопротивление термоэлектрической цепи,  $R_0 = 2a/\sigma + 2/\sigma_s$  — сопротивление полупроводникового образца,  $\sigma$  — его электропроводность,  $\alpha_s$  и  $\sigma_s$  — поверхностные термоэдс и электропроводность,  $R_m = 2b/\sigma_m, \sigma_m$  — электропроводность металлического участка цепи (поперечное сечение элементов цепи во всех точках полагается единичным),

$$\lambda = \frac{2a^*(\alpha - \alpha_s)(1 - \beta)\alpha_s + \beta\alpha}{\varkappa_e R}, \quad (4)$$

$$R_{\Pi} = \frac{2aT^*\gamma(\alpha - \alpha_s)^2}{\varkappa_e}, \quad (4)$$

$$\beta = 1 - \frac{(A_e + \delta A_p) - (B_e - B_p) \text{th}(ka)/ka}{A_e B_p + \delta A_p B_e}, \quad (5)$$

$$\gamma = \frac{\delta A_p + B_p \text{th}(ka)/ka}{A_e B_p + \delta A_p B_e}. \quad (5)$$

Для определения добротности полупроводниковых материалов произвольных размеров воспользуемся общим выражением для КПД термоэлемента

$$\eta = \frac{W}{q(x = -a)}, \quad (6)$$

где  $W = j^2 R_m$  — полезная мощность, выделяемая на нагрузке;  $q = q_e(x = -a) + q_p(x = -a)$  — полный тепловой поток, который подводится к горячему спаю. Электронная и фононная составляющие тепловых потоков задаются соотношениями [6]

$$q_e = -\varkappa_e \frac{dT_e}{dx} + \Pi(T_e)j, \quad (7)$$

$$q_p = -\varkappa_p \frac{dT_p}{dx}, \quad (8)$$

где  $\Pi(T_e) = \alpha T_e$  — коэффициент Пельтье. Объединяя (2), (7) и (8), из выражения (6) для КПД термоэлемента получим

$$\eta = \frac{\Delta T}{T_1} \left[ \frac{4}{Z^* T_1} + \frac{T_e(x = -a)}{T_1} \frac{\alpha}{[\alpha_s(1 - \beta) + \alpha\beta]} \frac{R}{R_m} \right]^{-1}, \quad (9)$$

где

$$Z^* = \frac{8a[\alpha_s(1 - \beta) + \alpha\beta]^2 R_m}{\varkappa_p(1 + \delta)R^2} \left[ 1 - \frac{A_e + \beta A_p(1 + \lambda)}{A_e B_p + \delta A_p B_e} \right]^{-1} \quad (10)$$

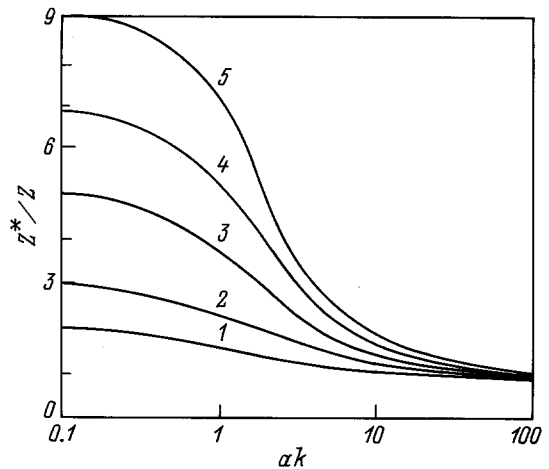
— параметр размерности обратной температуры, который естественно назвать термоэлектрической добротностью. Первый член в квадратных скобках (9) связан с необратимыми потерями тепла, обусловленными теплопроводностью, второй — с выделением тепла Пельтье. Отметим, что обобщенная термоэлектрическая добротность (10), кроме вещественных параметров полупроводникового материала, определяется и его поверхностными характеристиками.

В предельном случае изотермического контакта электронной и фононной подсистем массивного полупроводникового образца ( $a/L \gg 1$ ) с термостатами ( $\varkappa_{es} \gg \varkappa_e, \varkappa_{ps} \gg \varkappa_p$ ) имеем  $\gamma = 0, \beta = 1, R_{\Pi} = 0, T_e(x = -a) = T_1$  и выражение (9) при условии достижения максимальной мощности ( $R_0 = R_m$ ) переходит в известное [10]

$$\eta_w = \frac{\Delta T}{T_1} \frac{1}{4/Z^* T_1 + 2}, \quad (11)$$

где  $Z^* = Z$ .

Наиболее интересным с точки зрения термоэлектрического преобразования энергии является случай, когда фононная подсистема адиабатически изолирована, а электронная — изотермически контактирует с термостатами ( $\varkappa_{es} \gg \varkappa_e, \varkappa_{ps} \ll \varkappa_p$ ). Тогда (9) опять



Зависимость отношения  $Z^*/Z$  от линейных размеров образца при  $\varkappa_{es} \gg \varkappa_e, \varkappa_{ps} \ll \varkappa_p$  для разных значений  $\delta$ : 1 — 1, 2 — 0.5, 3 — 0.25, 4 — 0.17, 5 — 0.125.

преобразуется к виду (11) с тем отличием, что при этом

$$Z^* = Z \left( 1 + \frac{1}{\delta ak} \right). \quad (12)$$

В полупроводниковых образцах субмикронных размеров ( $a/L \ll 1$ )

$$Z^* = Z \left( 1 + \frac{1}{\delta} \right), \quad (13)$$

которое полностью совпадает с результатами [8]. Результаты расчета представлены на рисунке.

Оценки показывают, что в рассматриваемом случае, например, для InSb ( $\delta = 10^{-2}$  [11]), который является не лучшим термоэлектрическим материалом, при  $T = 300$  К и линейных размерах образца  $2a = 2$  мм и  $2a = 10^{-2}$  мм коэффициенты добротности составляют  $Z \approx 10^{-4}$  К $^{-1}$  и  $Z \approx 1.5 \cdot 10^{-3}$  К $^{-1}$  соответственно. При дальнейшем уменьшении геометрических размеров добротность увеличивается и достигает максимального значения  $Z = 7 \cdot 10^{-3}$  К $^{-1}$  в образце субмикронных размеров. Таким образом, при  $\kappa_{es} \gg \kappa_e$ ,  $\kappa_{ps} \ll \kappa_p$ ,  $\delta \ll 1$  и субмикронных размерах термоэлектрическая добротность даже плохих термоэлектрических материалов может превышать добротность лучших термоэлектрических материалов, в которых  $\delta \simeq 1$ . Этот результат объясняется тем, что в субмикронных образцах отсутствует электрон-фононное взаимодействие, поэтому фононная подсистема, будучи адиабатически изолированной, "выключается" из процесса переноса тепла от нагревателя к холодильнику, увеличивая тем самым добротность материала.

В действительности как идеальный теплообмен, так и полная теплоизоляция являются идеализацией, поэтому в реальных ситуациях эффект увеличения добротности будет меньшим.

Данная работа частично поддержана Международной программой образования точных наук Дж. Сороса (ISSEP) и Международного фонда возрождения (грант APV 062064).

## Список литературы

- [1] Л.И. Анатычук. (Справочник *Термоэлементы и термоэлектрические устройства*.) (Киев. думка, 1979).
- [2] М.Я. Грановский, Ю.Г. Гуревич. ФТП **9**, 1552 (1975).
- [3] А.И. Климовская, О.В. Снитко. Письма ЖЭТФ, **7**, 194 (1968).
- [4] А.И. Климовская. Автореф. канд. дис. (Киев, ИПАН УССР, 1972).
- [5] З.С. Грибников, В.И. Мельников. ЖЭТФ, **51**, 1909 (1966).
- [6] Ф.Г. Басс, В.С. Бочков, Ю.Г. Гуревич. ФТП **23**, 1895 (1989).
- [7] Л.П. Булат. Автореф. докт. дис. (Л., ЛПИ, 1989).
- [8] Г.Н. Логвинов. Изв. вузов. Физика № 9, 68 (1993).
- [9] Ю.Г. Гуревич, Г.Н. Логвинов. ФТП, **26**, 1945 (1992).

[10] *Термоэлектрические генераторы*, под ред. А.Р. Регеля (М., Атомиздат, 1976).

[11] Б.М. Могилевский, А.Ф. Чудновский. *Теплопроводность полупроводников* (М., Наука, 1972).

Редактор Т.А. Полянская

## Thermoelectric figure of merit of monopolar semiconductors with limited dimensions

V.S. Zakordonets, G.N. Logvinov

Ternopol State Pedagogical Institute,  
282009 Ternopol, the Ukraine

**Abstract** Thermoelectric figure of merit of monopolar non-degenerate semiconductors is investigated. Discrepancy between electron and phonon temperatures is taken into account. It is shown that figure of merit of specimen is determined by material parameters as well as by surface characteristics. Thermoelectric figure of merit increases when specimen linear dimensions decrease and reaches the maximum in submicron layers.